Réunion du Comité de liaison aux utilisateurs des lignes Proxima 1 et Proxima 2A, 15 avril 2013

Liste des participants

Marco BELLINZONI, Microbiologie Structurale, Institut Pasteur, Paris
Valérie BIOU, IBPC, Paris
Denis DURAN, PX-2, Soleil
Gavin FOX, PX-2a, Soleil
Ines GALLAY, IBBMC, Université Paris-Sud, Orsay
Valérie GUILLET, IPBS, Toulouse
Beatriz GUIMARES, PX-1, Soleil
Tatiana ISABET, PX-1, Soleil
Thomas KREY, Virologie Structurale, Institut Pasteur, Paris
Marie-Hélène LE DU, IBiTec-S, CEA, Saclay
Pierre LEGRAND, PX-1, Soleil
Alastair Mc Ewan, IGBMC, Illkirch
Solange MORERA, LEBS, Gif-sur-Yvette
Virginie ROPARS, Equipe Mobilité Structurale, Institut Curie, Paris
Martin SAVKO, PX-2, Soleil
William SHEPPARD, PX-2, Soleil
Gerlind SULZENBACHER, AFMB, Marseille
Andrew THOMPSON, PX-1, Soleil
François VALLEE, Sanofi – Research and Development, Vitry-sur-Seine
Jean-Pierre SAMAMA, Directeur Scientifique, Soleil, 10 :00-10 :30 et 13 :30 – 14 :15

Ordre du jour

10h00: accueil des participants dans la salle de contrôle de PX2 avec démonstration Robots par groupes de 5.
11h00: Ouverture de PX2, mode d'emploi maintenant qu'on a 2 lignes : échange d'échantillons entre les 2 lignes, partage des fichiers, organisation, ... (Bill)

12h00: repas à la cantine

13h00: discussion générale
13h30: discussion avec Jean-Pierre Samama
14h40:Criblage ou collecte en plaques - comment procéder. Discussion (Gavin)
15h45: PILATUS - retour d'expérience. Quid de PX2 ? Discussion (Andy)
16h00: Accès a distance / récupération des données à distance. Discussion (Pierre)
16h30: Formations : ReNaFoBiS (M-Ln)
16h00: Divers : discussions sur les priorités
17h00: dispersion

Compte rendu

Démonstration du Robot changeur d'échantillon par groupes (Beatriz Gumaraez et Tatiana Isabet)

Les deux lignes ont acheté des robots passeurs d'échantillon de marque IRELEC (CATS) utilisant des portoirs de type Unipuck. Chaque «puck» peut accueillir 16 cristaux montés sur tige, sans leur tube. Le prix des pucks étant élevé pour un laboratoire (environ 500 € par puck, soit autours de 4000 € pour un équipement complet), pour l'instant les utilisateurs viendront à SOLEIL avec leurs cristaux congelés et feront le transfert vers les pucks sur place avec l'aide des local-contacts. L'équipement pour faire le transfert sera disponible mi-Mai 2013.
Il en ressort que le transfert est assez difficile, surtout dans l'azote liquide car les pucks sont de couleur noire et difficiles à voir, et qu'il faut s'entrainer pour le faire correctement.
Ces pucks sont standard aux Etats-Unis, à Diamond et Petra (ligne MX de DESY).
Vu les difficultés de transfert, il ne sera pas aisé de récupérer des cristaux testés pour les mettre dans les pucks de l'ESRF. La question se pose de la possibilité de laisser temporairement des cristaux dans des pucks à SOLEIL en prévision d'un temps de faisceau ultérieur. Pour l'instant ceci n'est pas envisageable en raison des problèmes de sécurité et de coût de stockage.

Présentation de PX2A (Bill Shepard)

La ligne est maintenant presque totalement installée et fonctionnelle, à l'exception d'un miroir convexe qui permettra de pousser la focalisation horizontale du faisceau. Le faisceau est actuellement de 10 µm x 5 µm avec les miroirs-Kirkpatrick-Baez. De bonnes données ont déjà été collectées en SAD et en MAD. En particulier, la stabilité du faisceau est tout à fait compatible avec la micro-focalisation. Le mode de fonctionnement actuel est de 1 jour utilisateurs par semaine, qui s'étendra progressivement à l'ouverture totale fin 2013.
A terme, la ligne sera utilisable en trois modes :
- non focalisé (faisceau de 2 mm x 1 mm)
- Focalisé sans miroir convexe (faisceau de 15 µm x 5 µm)
- Focalisé avec miroir convexe (faisceau de 5 µm x 5 µm)

Du côté contrôle et informatique, les séquences pour le suivi et l'alignement sont mises en place. L'équipe de PX2 est au complet : Denis DURAN, Gavin FOX, Martin SAVKO et William SHEPARD.
La possibilité de passer des cristaux entre PX-1 à PX2-A en fin de run, dans les cas ou cela paraît nécessaire, est évoquée. Par contre, la façon de mettre ça en place ne paraît pas simple et reste à définir.

Discussion avec Jean-Pierre Samama

Stratégies pour un nouveau détecteur sur PX2A :

La taille du faisceau rend souhaitable l'acquisition d'un détecteur ayant des pixels plus petits et un bruit de collecte faible. La gamme Eiger de Dectris semble appropriée puisqu'elle fournit des détecteurs avec des pixels de 70 µm (au lieu de 172 µm pour le Pilatus). Le cout du détecteur et de l'infrastructure qui va avec est mis en avant. Il est souhaitable d'avoir déjà un retour d'expérience de PX-2 et de monter un cas scientifique en fin

d'année 2013 pour présenter l'intérêt d'un tel détecteur pour la ligne. Il sera aussi important d'avoir un appui important de la communauté française de cristallographie.

Organisation de l'accès à distance

Cet accès est de deux ordres. D'une part, les utilisateurs souhaitent transférer leurs données collectées sur place par un accès en ligne de type sftp, et d'autre part, les utilisateurs venant de laboratoires éloignés doivent pouvoir envoyer leurs cristaux et piloter l'expérience en ligne. Ces deux possibilités existent depuis longtemps à l'ESRF sans qu'il y ait eu de problèmes de sécurité.

En revanche, si l'accès aux données nécessite «seulement» des aménagements informatiques, la collecte à distance requiert de la main d'œuvre pour réceptionner les dewars, mettre en place les cristaux sur le changeur d'échantillons et s'assurer que l'expérience se passe bien. Cette nouvelle organisation permettra d'optimiser le temps de travail des chercheurs et de rationaliser la gestion des échantillons selon les directives de l'ANSM (autorité nationale de la santé et du médicament). Soleil fonctionne sur un nombre de postes contraints (pas plus de 359 postes). Un redéploiement de postes permettrait éventuellement de dégager une personne. Les industriels utilisent déjà beaucoup l'accès à distance à l'ESRF et pourraient appuyer la demande. JP Samama insiste sur le fait qu'il est essentiel que notre communauté s'organise pour faire des demandes « d'une seule voix » comme savent le faire les physiciens.

Allonger les durées des BAGs à deux ans au lieu d'un an actuellement

JP Samama argumente que la durée des BAGs est importante pour préserver une évaluation scientifique équitable. Il est d'accord sur le fait que le rapport d'expérience intermédiaire à 6 mois pourrait être allégé.

Diffraction *in situ* (Gavin Fox)

Gavin a présenté les développements qu'il met en place concernant les mesures directes sur plaques de cristallisation. Ces mesures peuvent servir à cribler systématiquement des plaques pour rechercher de la diffraction d'une part, et à collecter des données sur des cristaux individuels sans les monter et sans les congeler d'autre part. Les deux robots de PX1 et PX2 ont des pinces et vont bientôt avoir un «hôtel» pour stocker des plaques à tester. Le plastique et la géométrie des plaques doivent être adaptés pour minimiser l'absorption des rayons X et élargir l'angle d'ouverture pour permettre une collecte plus large. Pour le moment, 2 types de plaques sont prometteuses : crystalquickX de Greiner (8 €/plaque chez JenaBioscience) et InSitu1 de Mitegen (version beta 9,7$/plaque chez Mitegen USA). Les deux types de plaques coutent plus cher que les plaques classiques, mais il est possible que les prix baissent si la demande augmente. Les plaques Mitegen sont plus performantes (moins de bruit X) et supportent assez bien le transport, contrairement aux plaques Greiner.

Les développements de recherche systématique de cristal ou reconnaissance de forme seront utiles pour le criblage in situ. Après une période de mise au point à partir de l'été 2013, le système devrait être opérationnel fin 2014.

Coté cristallogénèse, un robot «plugmaker» est installé sur PX2A. Il permet d'établir des gradients linéaires de composés avec de très petits volumes de protéine. Pour l'instant il est en cours de tests et de mise au point avec l'aide du fabricant.

Accès aux données et collecte à distance (Pierre Legrand)

Système actuel

Le service informatique de SOLEIL a mis en place un système de stockage des données appelé «la ruche» qui permet aussi l'accès à distance par le « Soleil data retrieval interface ». Plusieurs lignes dont Swing et Disco les utilisent, mais ces lignes génèrent des volumes de données beaucoup plus faibles que les images de diffraction, et la disponibilité n'est pas immédiate (temps d'attente de quelques minutes). De plus, ces répertoires sont en lecture seule et ne permettent pas la génération de fichiers temporaires nécessaires au traitement des donnés. Ceci rend le traitement des données de diffraction problématique avec ce système. Ainsi, PX1 transfère les données périodiquement mais pas instantanément.
Ce manque empêche de faire des collectes à distance actuellement.

Mise en place d'un véritable accès à distance

Pour cette raison, il est souhaitable d'une part d'avoir un accès à distance rapide, facile et sécurisé aux données, avec la possibilité de mise à jour en continu (commande rsync). Cette demande a été faite au cours de la réunion du « Computing advisory committee » en mars 2013, qui la considère comme prioritaire pour le groupe informatique.

Collecte à distance

Celle-ci permettrait de rationaliser le nombre d'expérimentateurs se déplaçant au synchrotron. Elle nécessite l'ouverture d'un port de communication réseau et l'installation d'un programme d'émulation de type «nx» et d'un gestionnaire de base de données de type «ispyb». Un test simple de l'accès NX sera mis en place avant la fin 2013. François Vallée témoigne qu'Aventis utilise les accès à distance de l'ESRF, la plupart du temps avec succès. Ils communiquent avec les local contacts par la case «chat» de l'interface MXcube.

Synthèse

Les personnes présentes au comité de ligne attestent d'une forte demande de ces deux types d'accès à distance, et remarquent que ces demandes ont déjà été formulées maintes fois auparavant (Juin 2006 et Juin 2010). PX-1 accueille environ 600 visiteurs par an (contre 80-100 sur les autres lignes). La possibilité de collecter les données à distance est donc essentielle sur cette ligne.

Les utilisateurs du comité de liaison font part du souhait de pouvoir traiter les données à partir de leur laboratoire sur les ordinateurs de la ligne pour bénéficier des mises à jour des programmes, comme c'est le cas à l'ESRF. Pierre répond que ce serait possible si les machines de la ligne étaient accessibles, mais il faudrait laisser la priorité aux collectes en cours. Il indique aussi qu'un traitement automatique des données sera bientôt mis en place, permettant une évaluation rapide de la qualité des données.
Autre demande des utilisateurs : le site web de SOLEIL devrait apporter plus de clarté concernant les rapports d'expérience (pas les end of run reports) : fréquence et dates limites de dépôt, contenu.

Retour de l'utilisation du détecteur Pilatus 6M sur PX1 (Andy Thompson)

Le détecteur a permis de collecter d'excellentes données et a coïncidé avec une augmentation significative du nombre de dépôt de structures dans la PDB. C'est donc un excellent investissement. Il permet aussi des collectes moins conventionnelles comme des mesures résolues en énergie, ou la séparation de taches très proches. Andy insiste que PX2A bénéficiera beaucoup d'un détecteur pixels afin de tirer profit de l'absence de bruit, qu'il faut des pixels plus petits pour s'adapter à la taille du faisceau, mais qu'une taille plus réduite peut être suffisante. Il souhaiterait trouver des fonds rapidement car un délai de 18 mois est nécessaire pour le processus d'approvisionnement et la mise en place.

Réseau Nationale de Formation à la Biologe Structurale Intégrative (Marie Helene Le Du)

L'objectif du réseau est de mettre en commun des expertises nationales pour coordonner et valoriser des actions d'enseignement et de formation dans le domaine de la biologie structurale intégrative au niveau doctoral et de redonner une visibilité à nos formations pour augmenter leur attractivité auprès des étudiants. Donner une formation solide dans une « discipline spécifique » et forger une culture commune en BSI. Dans un premier temps, le RéNaFoBiS s'appuie sur des formations existantes qui ont/vont accepter d'afficher un partenariat/labellisation avec RéNaFoBiS, et s'adresse plutôt à des doctorants. Trois formations vont être soutenues cette année, et trois autres sont prévues l'année prochaine, dont une à Soleil.

Conclusions :

Quelques priorités ont été mises en avant :

- Mise en place de l'accès à distance
- Cartographie des boucles et 'merging' des données sur PX-2
- Evaluation de l'implication possible de FRISBI pour soutenir les démarches de la communauté d'utilisateurs

D'autres aspects ont été déplacés:

- Cas scientifique pour un détecteur pixellisé pour PX-2 : fin d'année 2013
- Criblage sur plaques : nécessite des utilisateurs